



ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRONICA DA BICAMADA DE GRAFENO ROTACIONADA

Nallyson William Santos Oliveira¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

Devido à artigos publicados recentemente, este presente trabalho busca estudar supercondutividade não convencional na bicamada de grafeno rotacionada. Para fazer esse estudo, nós utilizamos cálculos de primeiros princípios, baseado na teoria Funcional da Densidade (DFT) usando o método Full-Potencial Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW), que está contido nos códigos computacionais WIEN2k. Na construção da supercélula baseamos em duas monocamadas sendo que em uma delas iríamos rotacionar em relação a outra, e para isso, fixamos vetores unitários da rede em posições onde ocorria o empilhamento do tipo AA nas duas monocamadas. O ângulo escolhido para se realizar o estudo foi o de $21,8^\circ$. Em nossos resultados, temos a densidade de estados, na energia de Fermi, conseguimos visualizar a presença de estados o que não ocorre no material da bicamada não rotacionada. A estrutura de bandas nos mostra que as bandas cruzam a energia de Fermi no ponto K, onde nos mostra que o material vira metálico. Observamos que a densidade eletrônica entre os átomos de carbono na monocamada superior é de $1.2 \text{ e}/\text{Å}^3$, e na monocamada inferior é de $1.6 \text{ e}/\text{Å}^3$, no entanto a monocamada superior apresenta uma distribuição não homogênea entre os átomos de carbono.

Palavras-chave: Supercondutividade, Grafeno, WIEN2K.

¹Aluno do Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: nallyson01@outlook.com

²Doutor, Professor, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE TWISTED BILAYER GRAPHENE

ABSTRACT

Due to recently published articles, this paper seeks to study unconventional superconductivity in the twisted bilayer graphene. To do this study, we used first-principle calculations based on the Density Functional Theory (DFT) using the Full-Potential Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method, which is contained in the WIEN2k computational codes. In the construction of the supercell, we based on two stacked monolayers, one of which we would rotate in relation to the other, and for that, we fixed the unit vectors in the lattice in positions where the AA type stacking occurred in the two monolayers. The angle chosen to carry out the study was 21.8° . In our results, we have the density of states, in Fermi energy, we can visualize the presence of states, which does not occur in the non-rotated bilayer material. The band structure shows us that the bands cross Fermi energy at point K, where they show us that the material turns metallic. We observed that the electronic density between the carbon atoms in the upper monolayer is 1.2 and \AA^3 , and in the lower monolayer it is 1.6 and \AA^3 , however the upper monolayer has a non-homogeneous distribution between the carbon atoms.

Keywords: Superconductivity, Graphene, WIEN2K.